# 情報処理の熱力学とJarzynski等式(非平衡系の物理-非平衡ゆらぎと集団挙動-,研究会報告)



沙川, 貴大

# 情報処理の熱力学とJarzynski等式

東京大学大学院 理学系研究科　沙川 貴大 [1]

情報処理プロセスに適用できる形に一般化された熱力学について議論する．とくに，熱力学系がフィードバック制御された状況における熱力学第二法則とジャルジンスキ (Jarzynski) 等式について議論する．これらの関係式は，統計力学の基礎に関する問題に光を当てるとともに，熱ゆらぎにさらされた状況下でのナノマシン・ナノデバイスの制御・設計原理への応用が期待される．

## 1　イントロダクション

情報と熱力学の関係は「マクスウェルのデーモン」との関係において古くから指摘されてきたが，最初の定量的なモデルはシラード（L. Szilard）による．温度 $T=(k_{\rm B}\beta)^{-1}$ の熱浴と接触した一分子気体に対して，分子の位置を測定して1ビット（$=\ln 2$ ナット）の情報を得て，その測定結果に基づく操作をすることで，$k_{\rm B}T\ln 2$ の仕事をサイクルから取り出せるように見える．これがシラードが考えたモデル，いわゆる「シラード・エンジン」である [1]．このエンジンは,「等温サイクルから正の仕事は取り出せない」という熱力学第二法則に，一見すると反しているように見える．そのためこれは,「マクスウェルのデーモンのパラドックス」として，大きな議論を呼んできた [1]．

ここで，測定で得た情報量と取り出した仕事量が，$k_{\rm B}T$ を比例定数にして比例していることが重要である．このことから，情報量と熱力学量（仕事や自由エネルギーなど）の間には，一般的な関係があることが期待される．実際，現代的観点からは，デーモンの役割の本質は「測定によって熱ゆらぎに関する情報を得て，その測定結果に基づいた操作をする」というフィードバック制御であると理解され，熱力学第二法則とは矛盾しないことが知られている．ここで情報が重要な役割を果たすため，マクスウェルのデーモンが操作する熱機関はいわば「情報熱機関」と呼ぶことができる．しかし，近年まで情報と熱力学に関する一般的な理論研究はされてこなかった．最近の研究 [2, 3, 4] で我々は，以下のような一般的関係を統計力学の観点から一般的に導いた．

- 情報熱機関の効率の上限 [2]
- フィードバック制御された状況への Jarzynski 等式の一般化 [4]
- デーモンが測定結果を蓄えておくメモリを操作するために必要な仕事量の下限 [3]

本稿では，これらのうち，最初の二つの概略を議論する．

[1]E-mail: sagawa@cat.phys.s.u-tokyo.ac.jp

## 2　シャノン情報量と相互情報量

本題に入る前に，情報理論の概念を，古典系の場合について簡単に議論する．システムに対して測定を行ったときに得られる情報量として重要なのが，シャノン情報量と相互情報量である．これらはいずれもシャノン（C. Shannon）によって導入された量であり，情報理論において重要な役割を果たしている．

システムの位相空間の点を $\Gamma$ とし，測定結果を $y$ とする．システムの確率分布を $P[\Gamma]$ とする．また，一般には測定に誤差が伴うとして，システムの真の状態が $\Gamma$ という条件のもとで $y$ が得られる確率を $P[y|\Gamma]$ とする．測定誤差がない場合は $P[y|\Gamma]=\delta(y-\Gamma)$ となる（ここで $\delta(\cdot)$ はデルタ関数）．$\Gamma$ と $y$ の結合確率分布は $P[\Gamma,y]=P[y|\Gamma]P[\Gamma]$ で与えられる．

このとき，測定結果 $y$ のシャノン情報量（あるいはシャノンエントロピー）は

$$\langle H\rangle := -\int dy P[y]\ln P[y] \tag{1}$$

で定義される．ここで $\langle\cdots\rangle$ をつけたのは後の記法との整合性のためであり，$\langle H\rangle$ は $H:=-\ln P[y]$ のアンサンブル平均という意味である．定義から，$\langle H\rangle$ は測定結果 $y$ の確率分布だけで定義されており，測定で実際にどのくらいシステムに関する情報を得られたかとは無関係な量であることが分かる．たとえば，測定結果にたくさんノイズがのっていても，そのノイズのせいで $\langle H\rangle$ は大きくなりうる．すなわち，シャノン情報量は「測定結果のランダムネス」を表している．

一方，相互情報量は

$$\langle I\rangle := \int d\Gamma dy P[\Gamma,y]\ln\frac{P[y|\Gamma]}{P[y]} \tag{2}$$

と定義される．ここで $I:=\ln(P[y|\Gamma]/P[y])$ とする．相互情報量は測定で得た実質的な情報量を表しており，

$$0\le\langle I\rangle\le\langle H\rangle \tag{3}$$

という不等式を満たす．左側の等号は $\Gamma$ と $y$ が確率変数として独立なときに成立し，右側の等号は測定に誤差がないときに成立する．相互情報量は，「システムの状態と測定結果の相関」を表している．

## 3　情報熱機関の効率の上限

デーモンによるフィードバック制御がない場合，等温過程における熱力学第二法則は

$$\Delta F-\langle W\rangle\le 0 \tag{4}$$

と表現できる．ここで $\Delta F$ はシステムの自由エネルギー変化，$\langle W\rangle$ はシステムに対してした仕事 $W$ のアンサンブル平均である．不等式 (4) は，「システムに対してした仕事よりも多くの自由エネルギーを得ることはできない」または「自由エネルギーの減少分よりも多くの仕事を取り出すことはできない」と読める．デーモンによるフィードバックがある場合は，不等式 (4) は

$$\Delta F-\langle W\rangle\le k_{\mathrm{B}}T\langle I\rangle \tag{5}$$

と拡張されることを我々は導いた [2]．すなわち，測定でデーモンが得た相互情報量 $\langle I \rangle$ の分だけ，システムの自由エネルギーを増加させられる（または仕事を取り出せる）ことが分かる．この意味で，情報熱機関を用いれば，情報を熱力学的エネルギーに変換できる，ということができる．不等式 (5) はその「変換効率」の上限を与える．シラード・エンジンの場合は効率が 100 ％である（$\Delta F = 0$，$\langle W \rangle = -k_{\mathrm{B}} T \ln 2$，$\langle I \rangle = \ln 2$）．最近になって，サブミクロンスケールのコロイド粒子を用いた鳥谷部氏らによる実験で，情報から熱力学的エネルギーへの変換が初めて実現し，効率は約 30 ％であった [5]．

なお，量子系の場合にも (5) と同様の不等式を導くことができ，その場合は相互情報量の定義を量子的なものに変更することが必要である．

## 4　一般化ジャルジンスキ等式

1997 年にジャルジンスキ（C. Jarzynski）が発見した関係式 [6] によれば，熱力学第二法則は不等式だけでなく等式でも表現できる：

$$\langle e^{\beta(\Delta F - W)} \rangle = 1. \tag{6}$$

この等式の一次キュムラントの性質として，不等式 (4) を導ける．フィードバックがある場合は，ジャルジンスキ等式は，

$$\langle e^{\beta(\Delta F - W) - I} \rangle = 1 \tag{7}$$

と一般化される [4]．この一次キュムラントから，一般化第二法則 (5) を再導出することができる．また，ジャルジンスキ等式を別の形に一般化することもできる：

$$\langle e^{\beta(\Delta F - W)} \rangle = \gamma. \tag{8}$$

ここで $\gamma$ はフィードバックの効率を表す量であり，フィードバックがなければ 1，シラード・エンジンの場合は 2 になる．操作的には，$\gamma$ は,「測定結果 $y$ に対応する操作の逆操作を行い，そのあとで再び測定を行ったときに，もとと同じ測定結果 $y$ を得る確率」の和である．なお，$y$ が運動量のように時間反転で符号を変える量の時は，$y$ のかわりに $-y$ を得る確率とする．直観的に言えば，もしも制御が完全ならば，逆操作の際にシステムは必ずもとの状態に戻ってくるので，$\gamma$ は大きな値をとる．実際，シラード・エンジンの場合は，制御が完全で測定結果が 2 種類あるので，$\gamma = 2$ になっている．なお，逆操作を用いることで，式 (8) の左辺とは独立に，実験で直接測定 $\gamma$ を測定することができる．そのような測定を行うことで，式 (8) は実験的に検証された [5]．

一般化ジャルジンスキ等式 (7) は測定で得られた情報量を表す項 $I$ を含んでいるが，(8) にはフィードバックの効率（得られた情報をどれだけ有効に使ったか）を表す項 $\gamma$ が含まれている．両者の間には

$$\langle (\Delta F - W) I \rangle - \langle \Delta F - W \rangle \langle I \rangle = k_{\mathrm{B}} T \ln \gamma \tag{9}$$

という関係が，$(\Delta F - W)$ と $I$ の結合確率分布がガウシアンならば成り立つ（一般にはより高次のキュムラントを含んだ式になる）．式 (9) は,「$\gamma$ が大きければ大きいほど，得た情報 $I$ を有効に使って，フィードバックでより多くの自由エネルギーを獲得している（あるいは仕事を取り出している)」ことを表している．この意味でも，$\gamma$ はフィードバックの効率を表す量になっている．

なお，我々は「ゆらぎの定理 (fluctuation theorem)」を用いることで，古典系の場合について等式 (7) と (8) を一般的に導いた [4]．一方で最近，式 (8) は量子系の場合に拡張された [7]．

## 5　まとめ

我々は，フィードバック制御がある状況下への熱力学第二法則の拡張と，ジャルジンスキ等式等式の拡張を議論した．これらの式は，情報量と熱力学量が対等に扱われる形になっており，いわば情報熱力学の第二法則と呼ぶことができる．一方で，フィードバック制御以外にも様々な情報処理があるが，そのような状況への第二法則の一般化は部分的にしかなされておらず [3]，これからの課題である．

## 謝辞

京都大学基礎物理学研究所に感謝いたします．基研研究会 YITP-W-10-16「非平衡系の物理 - 非平衡ゆらぎと集団挙動 -」における議論は，本稿を執筆する上で大変有益でした．

## 参考文献

[1] *"Maxwell's demon 2: Entropy, Classical and Quantum Information, Computing"*, H. S. Leff and A. F. Rex (eds.), (Princeton University Press, New Jersey, 2003).

[2] T. Sagawa and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. **100**, 080403 (2008).

[3] T. Sagawa and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. **102**, 250602 (2009).

[4] T. Sagawa and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. **104**, 090602 (2010).

[5] S. Toyabe, T. Sagawa, M. Ueda, E. Muneyuki, and M. Sano, Nature Physics **6**, 988-992 (2010).

[6] C. Jarzynski, Phys. Rev. Lett. **78**, 2690 (1997).

[7] Y. Morikuni and H. Tasaki, arXiv:1012.2753 (2010).